

【補助事業概要の広報資料】

補助事業番号 25-100
補助事業名 平成25年度 カーボン材料の破壊靱性計算・評価補助事業
補助事業者名 愛媛大学大学院理工学研究科 教授 岡本 伸吾

1 補助事業の概要

(1) 事業の目的

材料を破断させるのに必要な応力が強度であるのに対し、亀裂を進展させるのに必要な応力拡大係数（亀裂先端近傍の応力場の特異性の強さを表すパラメータ（値が大きい程亀裂の進展に対する抵抗大））が破壊靱性値である。実際のカーボン材料はマクロ欠陥（亀裂）を含む場合が多く、一般に高い引張強度を有する材料は低い破壊靱性値を示す傾向がある。材料開発においては、引張強度、破壊靱性値両方をバランスさせる必要があり、カーボン材料の破壊靱性値を精度良く求めることが重要である。しかしながら、実験で求めた破壊靱性値は、実験条件により値のばらつきが大きくなるため、破壊靱性値を再現性良く求めることは困難を伴う。本研究の結果、カーボン材料破壊靱性を理論的に評価することができれば、再現性のよい破壊靱性値の予測が可能となる。その結果、材料設計に関してより明確な指針を得ることが可能となる。

(2) 実施内容

<http://www.me.ehime-u.ac.jp/labo/kikaisys/robins/outline/tank.html>

①MDモデルの妥当性検証

昨年度得られた炭素繊維モデルの妥当性についての検証を深めるため、応力下でのラマンスペクトルが実験結果と一致するかどうかを検討する。分子動力学（MD）計算における各原子の速度から、ラマンスペクトルを予測するための解析コードを作成した。基礎検討として、炭素繊維の基本構造であるグラフェンのモデルを用いて、分子動力学計算によりGバンドの振動を解析し、これまで報告されている実験結果と比較した。グラフェンの両端を把持して一定の振動数で強制的に振動させ、そのときの把持していない部分の格子振動の強さと振動数との関係を調べたところ、振動の強さが最大となる振動数、すなわちGバンドの予測値 1545 cm^{-1} が、実測値 1586 cm^{-1} に近いことを確認した。

さらに、グラフェンの圧縮のMD計算を行い、圧力と振動数の関係を調べた。その結果、図1に示すように、応力と振動数のシフトの関係が実験結果に近いことを確認した。本手法の炭素繊維モデルへの応用については、現在検討中である。

また、弾性率の異なる3種類の炭素繊維について、本事業の委託事業費を利用して熱伝導率を測定した。さらに、弾性率の異なる2種類の炭素繊維に含まれる sp^3 炭素濃度について、固体NMR法を用いて評価した。今後、これらの結果を炭素繊維モデルの構築

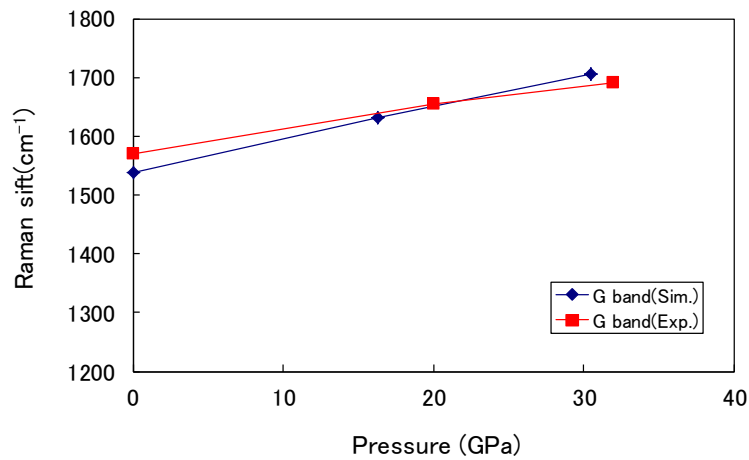


図1 ラマン振動数と圧縮応力の関係

に反映させて、モデルの精密化を行う。

炭素繊維の構造モデルに関して、現時点で得られている成果について、国際会議 (ICMIE2013, イタリア) において、発表した。図2に本発表内容の一部を示す。本内容の論文は、主催学会のジャーナル誌に投稿推薦され、掲載された。

Fracture progression of PAN-based CF

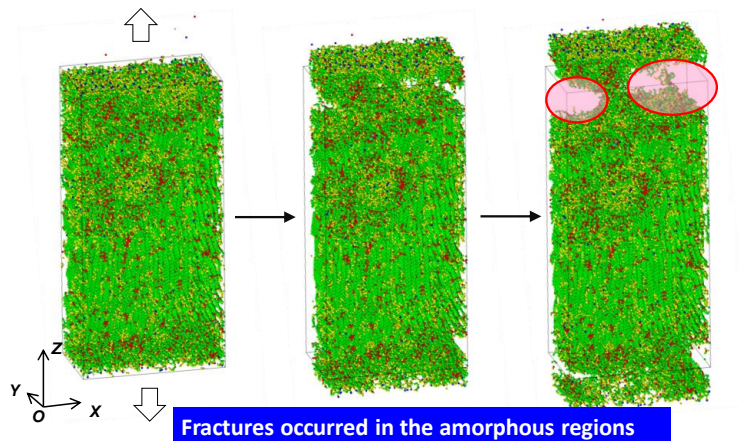


図2 国際会議 (ICMIE2013) における発表内容

②連続体領域解析コードの作成

本研究では、マクロ欠陥（亀裂）を含む炭素繊維モデルの破壊靱性を評価するためのツールを構築することが目的である。計算効率向上のため、亀裂すなわち破壊の先端部分周辺をMD法で、それ以外を連続体力学による手法でモデル化する。後者の領域

については、すでにインターネット上で公開されている解析コードが見つかったため、それを用いることとした。

③MD+連続体モデルの境界領域の検討

②の連続体解析用コードを用いて、MDによるモデルとの連結を検討中である。

2 予想される事業実施効果

これまでの研究により、炭素繊維のナノ構造が明らかになってきた。破壊靱性を予測するための解析ツールは、開発を続け、得られたツールを用いて、引張強度と破壊靱性を両立する構造を明らかにしていくが、今後は、圧縮強度やせん断強度など、引張り以外の特性に関しても、構造との関係を明らかにすることで、材料設計に関して、より一層明確な指針を得ることが期待できる。また、現実の炭素繊維の製造において、如何なる工夫を行えば、高強度を発現する構造を得ることができるかについては、製造過程を含めたシミュレーション手法を構築することが重要である。

3 補助事業に係る成果物

(1) 補助事業により作成したもの

【論文・学会発表】

- ① Ito, A., Okamoto, S., Tensile and Shearing Properties of Vacancy-Containing Graphene using Molecular Dynamics Simulations, Journal of Communication and Computer, Vol.10, (2013), pp.9-18.
- ② Okamoto, S., Ito, A., Molecular Dynamics Analysis on Tensile and Shearing Properties of Nitrogen-Containing Graphene, Journal of Communication and Computer, Vol. 10, (2013), pp. 19-27.
- ③ Ito, A., Okamoto, S., Using Molecular Dynamics to Assess Mechanical Properties of PAN-Based Carbon Fibers Comprising Imperfect Crystals with Amorphous Structures, International Journal of Mechanical, Industrial Science and Engineering, Vol.7, No. 9, (2013) 301-306.
- ④ Ito, A., Okamoto, S., Using Molecular Dynamics to Assess Mechanical Properties of PAN-Based Carbon Fibers Comprising Imperfect Crystals with Amorphous Structures, Proceedings of International Conference on Mechanical and Industrial Engineering, Vol. 81, (2013), pp. 1020-1025.
- ⑤ Okamoto, S., Ito, A., Shear Properties of Graphene Containing Nitrogen Atoms and Grain Boundaries Using Molecular Dynamics Simulations, Proceedings of the

International MultiConference of Engineers and Computer Scientists 2014 (IMECS 2014), Vol. 1, (2014), pp. 529–534.

- ⑥ Ito, A., Okamoto, S., Effect of Point Defects on Shear Properties of Graphene Using Molecular Dynamics Simulations, Proceedings of the International MultiConference of Engineers and Computer Scientists 2014 (IMECS 2014), Vol. 2, (2014), pp. 886–891.
- ⑦ 伊藤明彦, 岡本伸吾, アモルファス構造を含むPAN系炭素繊維の機械的特性評価に関する分子動力学解析, 第18回分子動力学シンポジウム予講集, (2013).



図3 IMECS 2014での発表風景

(2)(1) 以外で当事業において作成したもの
該当なし。

4 事業内容についての問い合わせ先

所属機関名： 愛媛大学（エヒメダイガク）

住 所： 〒790-8577

愛媛県松山市文京町3番

申 請 者： 教授 岡本伸吾（オカモトシngo）

担 当 部 署： 大学院理工学研究科 生産環境工学専攻（ダイガクインリコウガクケン
ンキュウカ セイサンカンキョウコウガクセンコウ）

E-mail: okamoto.shingo.mh@ehime-u.ac.jp

URL: <http://kenqweb.office.ehime-u.ac.jp/Profiles/0009/0002042/profile.html>